

(19)世界知的所有権機関
国際事務局(43)国際公開日
2005年8月11日 (11.08.2005)

PCT

(10)国際公開番号
WO 2005/073747 A1

(51)国際特許分類: G01R 33/465, G01N 24/08
 (72)発明者: および
 (21)国際出願番号: PCT/JP2005/001872
 (75)発明者/出願人(米国についてのみ): 河野 俊之
 (22)国際出願日: 2005年2月2日 (02.02.2005)
 (76)市南大谷11号 株式会社三菱化学生命科学研究所
 (25)国際出願の言語: 日本語
 (74)代理人: 特許業務法人特許事務所サイクス (SIKS & CO.)
 (26)国際公開の言語: 日本語
 (75)代理人: 特許業務法人特許事務所サイクス (SIKS & CO.)
 (30)優先権データ: 特願2004-025592 2004年2月2日 (02.02.2004) JP
 (71)出願人(米国を除く全ての指定国について): 三菱化
 学株式会社 (MITSUBISHI CHEMICAL CORPORA-
 TION) [JP/JP]; 〒1080014 東京都港区芝五丁目33番
 8号 Tokyo (JP).
 (81)指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が
 可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR,
 BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM,
 DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU,
 ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS,
 LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA,

/統葉有/

(54)Title: NMR SIGNAL ASSIGNMENT METHOD

(54)発明の名称: NMRシグナル帰属方法

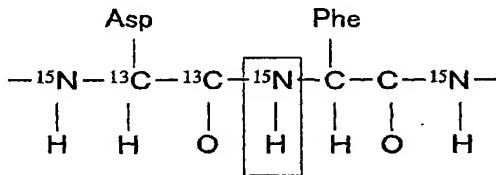
A

```

SDKIIHLTDD  SFDTDVLKAD  GAILVDEWAE  30
WCGPCKMIAPI  ILDEIADYEQ  GKLTVAKLNI  60
DQNP GTAPKY  GIRGIPPTLLL  FKNGEVAATK  90
VGALSKGQLK  EFLDANLA  108

```

B



(57)Abstract: It is intended to provide a method of highly efficiently and quickly assigning signals obtained by ^1H - ^{15}N HSQC, etc. which is usable as a substitute for the existing signal assignment method wherein a protein concentration several to ten times higher than the minimum protein concentration required in the high-sensitive ^1H - ^{15}N HSQC measurement method is needed; a method of highly efficiently and quickly specifying the three-dimensional structure of a target protein by using the above method; or a method of specifying the binding site of a target protein to a ligand. Namely, a plural number (20 or 39 at the largest) of proteins are synthesized by systematically combining a ^{15}N / ^{13}C double-labeled amino acid, a ^{15}N -labeled amino acid, etc. with an unlabeled amino acid for each amino acid constituting a target protein. Then these proteins are subjected to NMR measurement in such a manner as enabling the identification of correlated signals of two amino acid residues adjacent to each other and the thus obtained signals are compared.

(57)要約: 本発明の目的は、感度の良い ^1H - ^{15}N HSQC測定方法で観測可能な蛋白質最低濃度の、数倍から10倍以上の蛋白質濃度が必要であった従来のシグナル帰属方法に代わり、 ^1H - ^{15}N HSQC等で得られたシグナルを高効率かつ迅速に帰属する方法の提供、該方法を用いた高効率または迅速な標的蛋白質の立体構造特定方法あるいは目的蛋白質とリガンドとの結合部位を特定する方法を提供することである。本発明においては、目的タンパク質を、

WO 2005/073747 A1

/統葉有/